

THE JOURNAL OF
PHYSICAL CHEMISTRY

J. Phys. Chem., 1996, 100(12), 5039-5049, DOI: [10.1021/jp9530055](https://doi.org/10.1021/jp9530055)

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



ACS Publications

MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1996 American Chemical Society

H-5049-1

Table 10. Anisotropic displacement parameters U_{ij} [10^7 pm²] for **1a**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Si1	11(1)	9(1)	7(1)	0	0	1(1)
Si2	11(1)	11(1)	12(1)	1(1)	-1(1)	0(1)
Si3	12(1)	11(1)	11(1)	1(1)	1(1)	0(1)
Si4	11(1)	10(1)	11(1)	1(1)	1(1)	1(1)
Si5	12(1)	9(1)	6(1)	1(1)	-1(1)	0(1)
O12	21(2)	57(2)	19(2)	0(1)	-11(1)	1(1)
O15	43(2)	14(1)	28(2)	-9(1)	-1(1)	1(1)
O22	14(2)	36(2)	20(2)	0	0	-2(1)
O23	38(1)	13(1)	26(2)	4(1)	5(1)	-7(1)
O24	40(2)	11(1)	29(1)	-2(1)	6(1)	8(1)
O34	49(2)	35(2)	21(2)	-17(1)	18(2)	-4(2)
O35	18(1)	29(1)	26(1)	9(1)	-6(1)	7(1)
O43	10(2)	30(2)	28(2)	5(1)	2(1)	1(1)
O45	18(1)	35(2)	27(1)	12(1)	-8(1)	5(1)
O55	37(2)	27(2)	3(2)	0	0	-1(2)
C1	118(10)	80(7)	61(6)	0	0	-9(5)
C2	103(6)	85(5)	76(4)	5(4)	2(3)	1(4)
C3	238(22)	121(12)	33(5)	0	0	3(17)
C4	294(42)	194(30)	36(6)	0	0	-57(23)
C5	162(19)	254(29)	42(7)	0	0	32(25)

Table 11. Anisotropic displacement parameters U_{ij} [10^7 pm²] for **1b**. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Si1	11(1)	9(1)	10(1)	0	0	0(1)
Si2	10(1)	10(1)	17(1)	1(1)	-2(1)	1(1)
Si3	10(1)	10(1)	11(1)	2(1)	-1(1)	1(1)
Si4	10(1)	9(1)	10(1)	1(1)	-1(1)	1(1)
Si5	10(1)	8(1)	7(1)	1(1)	-1(1)	-1(1)
O12	20(1)	46(2)	28(1)	-1(1)	-15(1)	4(1)
O15	38(1)	12(1)	30(1)	-9(1)	-4(1)	1(1)
O22	4(2)	40(2)	32(2)	0	0	-2(1)
O23	34(1)	13(1)	29(1)	5(1)	5(1)	-4(1)
O24	44(1)	12(1)	34(1)	-2(1)	5(1)	7(1)
O34	39(1)	35(2)	15(1)	-12(1)	2(1)	1(1)
O35	14(1)	26(1)	17(1)	4(1)	-3(1)	9(1)
O43	7(1)	32(2)	33(2)	7(1)	3(1)	2(1)
O45	16(1)	34(1)	22(1)	10(1)	-6(1)	6(1)
O55	23(2)	22(2)	7(2)	0	0	-4(1)

H-5049-2

Table 12. Observed and calculated structure factors for 1a.

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1326	1402	23	3	12	0	45	40	14	3	10	1	1234	1229	22	3	8	2	9	21	9	7	6	3	206	208	8
4	0	0	3565	3555	63	4	12	0	58	67	10	4	10	1	40	43	16	4	8	2	572	545	11	0	7	3	2232	2207	56
6	0	0	1531	1550	32	5	12	0	43	32	13	5	10	1	172	172	7	5	8	2	25	30	24	1	7	3	76	69	4
8	0	0	119	143	12	1	13	0	281	281	8	6	10	1	42	48	13	6	8	2	328	328	9	2	7	3	476	492	9
1	1	0	1070	1133	19	2	13	0	39	17	15	0	11	1	159	151	8	7	8	2	92	104	7	3	7	3	92	93	5
2	1	0	85	88	3	3	13	0	635	608	18	1	11	1	0	46	1	1	9	2	160	162	6	4	7	3	1024	1049	19
3	1	0	276	328	6	4	13	0	121	124	5	2	11	1	693	704	13	2	9	2	73	65	6	5	7	3	71	79	10
4	1	0	288	264	10	0	14	0	1101	1094	29	3	11	1	36	47	35	3	9	2	77	76	13	6	7	3	384	371	9
5	1	0	415	436	11	1	14	0	23	10	22	4	11	1	172	142	7	4	9	2	26	1	25	7	7	3	54	63	8
6	1	0	63	78	15	2	14	0	35	41	34	5	11	1	0	3	1	5	9	2	217	226	8	1	8	3	825	843	15
7	1	0	583	551	63	3	14	0	0	23	1	1	12	1	108	127	5	6	9	2	0	12	1	2	8	3	34	44	15
8	1	0	0	38	1	1	15	0	627	639	12	2	12	1	44	49	10	0	10	2	1288	1262	33	3	8	3	865	883	16
0	2	0	1088	1175	27	2	15	0	0	19	1	3	12	1	604	591	12	1	10	2	74	66	6	4	8	3	150	151	6
1	2	0	86	90	3	1	0	1	922	960	16	4	12	1	54	58	10	2	10	2	1358	1314	24	5	8	3	1333	1331	24
2	2	0	571	568	10	3	0	1	506	576	22	5	12	1	355	371	11	3	10	2	33	30	33	6	8	3	0	8	1
3	2	0	42	43	9	5	0	1	583	566	11	0	13	1	51	30	14	4	10	2	361	358	9	7	8	3	443	464	22
4	2	0	326	346	7	7	0	1	829	838	27	1	13	1	33	33	33	5	10	2	0	32	1	0	9	3	790	780	21
5	2	0	110	97	6	0	1	1	222	311	6	2	13	1	340	333	9	6	10	2	0	9	1	1	9	3	125	116	5
6	2	0	407	420	15	1	1	1	14	19	13	3	13	1	0	50	1	1	11	2	219	221	10	2	9	3	749	720	14
7	2	0	27	33	26	2	1	1	1813	1815	32	4	13	1	91	90	5	2	11	2	0	33	1	3	9	3	77	83	7
8	2	0	95	91	14	3	1	1	106	92	8	1	14	1	165	161	6	3	11	2	91	91	9	4	9	3	371	358	15
1	3	0	1565	1588	28	4	1	1	361	350	25	2	14	1	0	14	1	4	11	2	0	29	1	5	9	3	122	123	5
2	3	0	60	57	3	5	1	1	34	13	33	3	14	1	444	437	9	5	11	2	334	348	13	6	9	3	157	168	12
3	3	0	32	42	10	6	1	1	590	550	57	0	15	1	119	110	7	0	12	2	690	690	19	1	10	3	39	45	16
4	3	0	278	262	7	7	1	1	125	124	7	1	15	1	34	38	34	1	12	2	17	22	17	2	10	3	78	72	15
5	3	0	1785	1788	32	8	1	1	260	257	27	2	15	1	654	657	12	2	12	2	60	64	8	3	10	3	859	836	21
6	3	0	81	80	7	1	2	1	743	803	13	0	0	2	2529	2636	64	3	12	2	0	6	1	4	10	3	138	138	5
7	3	0	749	735	24	2	2	1	53	58	4	2	0	2	2927	3431	152	4	12	2	491	488	14	5	10	3	500	492	10
8	3	0	49	54	9	3	2	1	182	228	5	4	0	2	1017	958	38	5	12	2	0	15	1	6	10	3	22	18	21
0	4	0	4122	3952	104	4	2	1	0	17	1	6	0	2	252	249	8	1	13	2	20	10	20	0	11	3	187	197	11
1	4	0	107	104	4	5	2	1	104	93	5	8	0	2	410	416	31	2	13	2	65	65	9	1	11	3	62	64	45
2	4	0	818	819	15	6	2	1	0	13	1	1	1	2	221	231	4	3	13	2	663	630	13	2	11	3	1142	1150	21
3	4	0	53	47	7	7	2	1	499	500	25	2	1	2	161	148	5	4	13	2	38	19	23	3	11	3	0	24	1
4	4	0	855	898	15	8	2	1	48	55	9	3	1	2	87	38	11	0	14	2	655	635	18	4	11	3	71	74	28
5	4	0	261	244	7	0	3	1	264	308	7	4	1	2	56	51	6	1	14	2	0	8	1	5	11	3	89	105	8
6	4	0	1174	1183	21	1	3	1	15	20	14	5	1	2	285	288	22	2	14	2	423	414	9	1	12	3	885	849	17
7	4	0	0	4	1	2	3	1	722	723	13	6	1	2	141	137	19	3	14	2	38	46	15	2	12	3	0	30	1
8	4	0	226	237	7	3	3	1	95	95	4	7	1	2	216	212	32	1	15	2	169	156	7	3	12	3	486	477	10
1	5	0	1439	1486	25	4	3	1	78	66	4	8	1	2	34	31	34	2	15	2	37	24	13	4	12	3	28	57	27
2	5	0	56	53	4	5	3	1	70	77	7	0	2	2	462	529	12	1	0	3	710	604	13	5	12	3	1178	1199	21
3	5	0	218	226	6	6	3	1	127	122	6	1	2	2	0	19	1	3	0	3	50	84	10	0	13	3	580	574	17
4	5	0	122	116	8	7	3	1	108	103	6	2	2	2	449	476	8	5	0	3	509	461	22	1	13	3	0	7	1
5	5	0	1483	1494	27	8	3	1	237	245	14	3	2	2	34	37	9	7	0	3	729	728	50	2	13	3	104	109	10
6	5	0	49	40	16	1	4	1	602	589	11	4	2	2	230	235	6	0	1	3	715	800	18	3	13	3	0	0	1
7	5	0	244	243	7	2	4	1	133	124	8	5	2	2	0	9	1	1	1	3	0	23	1	4	13	3	247	242	7
0	6	0	650	531	17	3	4	1	335	304	7	6	2	2	541	531	19	2	1	3	1471	1440	52	1	14	3	62	66	13
1	6	0	222	220	5	4	4	1	77	72	6	7	2	2	60	73	15	3	1	3	0	10	1	2	14	3	0	31	1
2	6	0	416	403	8	5	4	1	354	342	13	8	2	2	137	138	10	4	1	3	636	607	29	3	14	3	274	272	7
3	6	0	0	1	1	6	4	1	85	71	6	1	3	2	103	112	10	5	1	3	268	242	12	0	15	3	568	552	16
4	6	0	98	115	5	7	4	1	240	255	8	2	3	2	130	132	4	6	1	3	555	543	58	1	15	3	69	68	7
5	6	0	227	217	11	8	4	1	115	127	14	3	3	2	981	1048	17	7	1	3	101	106	7	2	15	3	765	747	14
6	6	0	431	447	23	0	5	1	194	195	7	4	3	2	60	55	6	8	1	3	175	178	31	0	0	4	666	750	17
7	6	0	0	7	1	1	5	1	0	5	1	5	3	2	680	689	13	1	2	3	1989	1970	35	2	0	4	937	875	17
1	7	0	1386	1416	25	2	5	1	726	812	13	6	3	2	108	113	9	2	2	3	37	25	8	4	0	4	351	364	8
2	7	0	140	136	5	3	5	1	0	4	1	7	3	2	938	946	34	3	2	3	65	36	4	6	0	4	830	825	21
3	7	0	185	193	6	4	5	1	339	349	7	8	3	2	0	20	1	4	2	3	107	101	4	8	0	4	236	279	25
4	7	0	76	70	6	5	5	1	27	5	26	0	4	2	1910	1895	48	5	2	3	1691	1689	74	1	1	4	1188	1167	30
5	7	0	1791	1809	32	6	5	1	295	295	8	1	4	2	70	72	3	6	2	3	42	45	27	2	1	4	59	54	9
6	7	0	138	135	6	7	5	1																					

H-5049-3

Table 12. Observed and calculated structure factors for 1a.

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	5	4	0	18	1	6	3	5	474	469	27	6	2	6	146	146	30	1	2	7	536	584	10	1	2	8	62	65	6
3	5	4	46	48	10	7	3	5	56	50	10	7	2	6	58	73	17	2	2	7	0	37	1	2	2	8	366	291	16
4	5	4	80	75	25	1	4	5	210	212	5	1	3	6	845	871	17	3	2	7	1689	1674	30	3	2	8	24	15	23
5	5	4	1161	1165	26	2	4	5	0	22	1	2	3	6	124	114	5	4	2	7	48	43	11	4	2	8	582	554	34
6	5	4	44	47	12	3	4	5	336	335	7	3	3	6	1141	1116	30	5	2	7	245	247	19	5	2	8	44	61	44
7	5	4	189	189	20	4	4	5	0	38	1	4	3	6	99	103	7	6	2	7	70	65	8	6	2	8	156	147	12
0	6	4	1098	1073	28	5	4	5	0	16	1	5	3	6	275	284	12	7	2	7	695	704	63	7	2	8	57	54	13
1	6	4	115	110	4	6	4	5	0	24	1	6	3	6	54	54	11	0	3	7	1071	1087	27	1	3	8	180	190	6
2	6	4	575	614	11	7	4	5	121	117	11	7	3	6	775	781	46	1	3	7	183	181	5	2	3	8	89	86	5
3	6	4	63	66	6	0	5	5	467	640	13	0	4	6	799	734	20	2	3	7	356	326	8	3	3	8	98	119	12
4	6	4	77	73	6	1	5	5	60	60	4	1	4	6	24	19	23	3	3	7	46	46	19	4	3	8	49	47	27
5	6	4	0	26	1	2	5	5	320	339	9	2	4	6	1059	1005	19	4	3	7	1045	1034	22	5	3	8	466	422	30
6	6	4	300	322	8	3	5	5	50	45	14	3	4	6	77	68	5	5	3	7	0	44	1	6	3	8	0	33	1
7	6	4	30	9	30	4	5	5	561	568	16	4	4	6	199	176	7	6	3	7	438	420	20	7	3	8	182	205	29
1	7	4	42	54	11	5	5	5	49	49	17	5	4	6	95	90	6	7	3	7	0	13	1	0	4	8	968	915	25
2	7	4	0	19	1	6	5	5	362	364	19	6	4	6	287	303	9	1	4	7	0	16	1	1	4	8	134	126	5
3	7	4	176	194	7	7	5	5	49	56	15	7	4	6	131	137	7	2	4	7	0	14	1	2	4	8	824	744	15
4	7	4	66	71	8	1	6	5	786	764	14	1	5	6	1017	983	18	3	4	7	643	643	12	3	4	8	26	16	26
5	7	4	45	33	30	2	6	5	20	37	20	2	5	6	123	116	11	4	4	7	43	35	42	4	4	8	287	281	8
6	7	4	0	2	1	3	6	5	650	638	12	3	5	6	905	913	16	5	4	7	479	487	17	5	4	8	88	94	8
7	7	4	152	161	5	4	6	5	82	81	6	4	5	6	35	45	20	6	4	7	91	95	8	6	4	8	58	66	24
0	8	4	737	787	19	5	6	5	546	526	18	5	5	6	1449	1448	52	7	4	7	396	413	28	7	4	8	125	128	18
1	8	4	119	107	7	6	6	5	0	3	1	6	5	6	49	38	14	0	5	7	272	262	9	1	5	8	886	839	16
2	8	4	554	562	14	7	6	5	90	82	11	7	5	6	852	891	48	1	5	7	91	98	4	2	5	8	22	17	22
3	8	4	81	76	6	0	7	5	1615	1567	41	0	6	6	159	173	8	2	5	7	449	461	9	3	5	8	693	684	17
4	8	4	640	654	16	1	7	5	0	28	1	1	6	6	26	45	26	3	5	7	39	24	13	4	5	8	0	8	1
5	8	4	52	39	11	2	7	5	90	85	6	2	6	6	117	114	12	4	5	7	152	161	6	5	5	8	1293	1267	31
6	8	4	149	171	12	3	7	5	0	4	1	3	6	6	78	78	6	5	5	7	15	16	15	6	5	8	0	24	1
7	8	4	0	4	1	4	7	5	753	753	18	4	6	6	219	213	10	6	5	7	304	292	17	7	5	8	484	479	52
1	9	4	729	741	14	5	7	5	73	80	13	5	6	6	133	139	7	7	5	7	0	32	1	0	6	8	543	528	15
2	9	4	36	11	36	6	7	5	382	374	9	6	6	6	208	205	11	1	6	7	19	9	19	1	6	8	86	85	7
3	9	4	189	203	7	7	7	5	35	18	16	7	6	6	134	138	6	2	6	7	66	57	6	2	6	8	0	8	1
4	9	4	0	11	1	1	8	5	602	633	11	1	7	6	447	456	9	3	6	7	955	930	33	3	6	8	30	36	29
5	9	4	871	867	16	2	8	5	13	16	13	2	7	6	103	101	8	4	6	7	46	52	45	4	6	8	269	259	8
6	9	4	0	4	1	3	8	5	160	163	7	3	7	6	1023	1030	30	5	6	7	420	407	28	5	6	8	105	95	6
0	10	4	203	230	10	4	8	5	0	4	1	4	7	6	0	4	1	6	6	7	86	91	14	6	6	8	333	371	13
1	10	4	34	13	22	5	8	5	1026	1029	24	5	7	6	123	104	13	7	6	7	385	400	13	7	6	8	110	133	8
2	10	4	591	604	12	6	8	5	49	66	27	6	7	6	31	30	30	0	7	7	1374	1375	35	1	7	8	0	15	1
3	10	4	0	27	1	0	9	5	834	805	22	7	7	6	681	728	34	1	7	7	181	175	9	2	7	8	0	3	1
4	10	4	614	637	16	1	9	5	0	9	1	0	8	6	1043	1010	27	2	7	7	425	416	10	3	7	8	296	306	15
5	10	4	38	37	29	2	9	5	481	503	10	1	8	6	42	43	9	3	7	7	64	53	7	4	7	8	0	1	1
6	10	4	48	47	8	3	9	5	30	13	30	2	8	6	1974	1977	35	4	7	7	1022	1026	24	5	7	8	453	423	10
1	11	4	579	595	12	4	9	5	560	572	18	3	8	6	24	18	24	5	7	7	9	13	8	6	7	8	0	5	1
2	11	4	0	29	1	5	9	5	23	35	23	4	8	6	61	63	8	6	7	7	461	457	10	0	8	8	1785	1761	45
3	11	4	105	112	5	6	9	5	0	20	1	5	8	6	112	118	6	1	8	7	511	502	10	1	8	8	171	176	6
4	11	4	0	19	1	1	10	5	546	551	11	6	8	6	431	446	14	2	8	7	26	16	26	2	8	8	751	726	14
5	11	4	641	646	22	2	10	5	41	5	14	1	9	6	548	532	11	3	8	7	847	841	16	3	8	8	37	45	36
0	12	4	510	497	15	3	10	5	634	629	12	2	9	6	91	91	5	4	8	7	0	4	1	4	8	8	748	737	21
1	12	4	26	12	26	4	10	5	0	10	1	3	9	6	328	321	8	5	8	7	169	167	7	5	8	8	37	67	36
2	12	4	474	481	11	5	10	5	534	526	11	4	9	6	88	85	6	6	8	7	46	46	15	6	8	8	285	304	8
3	12	4	0	39	1	6	10	5	21	28	20	5	9	6	821	823	22	0	9	7	438	426	14	1	9	8	300	280	8
4	12	4	345	352	9	0	11	5	926	988	25	6	9	6	0	14	1	1	9	7	181	172	8	2	9	8	82	74	7
5	12	4	61	67	7	1	11	5	107	109	6	0	10	6	984	990	26	2	9	7	228	212	8	3	9	8	420	399	10
1	13	4	154	147	6	2	11	5	374	369	9	1	10	6	124	122	8	3	9	7	89	99	6	4	9	8	96	104	11
2	13	4	32	4	24	3	11	5	51	52	10	2	10	6	1340	1347	24	4	9	7	251	240	8	5	9	8	540	504	11
3	13	4	24	25	23	4	11	5	573	588	21	3	10	6	86	84	10	5	9	7	63	62	10	6	9	8	0	27	1
4	13	4	0	26	1	5	11	5	50	49	11	4	10	6	252	273	14	6	9	7	38	19	38	0	10	8	1355	1313	35
0	14	4	159	159	8	1	12	5	341	335	9	5	10	6	0	3	1	1	10	7	576	555	12	1	10	8	149	131	6
1	14	4	23	4	22	2	12	5	53	55	11	6	10	6	289	315	7	2	10	7	46	8	15						

H-5049-4

Table 12. Observed and calculated structure factors for 1a.

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	2	9	919	867	17	5	2	10	43	47	43	6	3	11	421	387	30	2	6	12	498	468	11	3	10	13	0	8	1
2	2	9	20	14	20	6	2	10	580	516	27	1	4	11	139	145	6	3	6	12	0	41	1	0	11	13	37	73	37
3	2	9	257	254	8	7	2	10	0	10	1	2	4	11	123	115	5	4	6	12	86	48	18	1	11	13	102	104	6
4	2	9	0	23	1	1	3	10	189	190	8	3	4	11	813	826	16	5	6	12	198	197	14	2	11	13	527	528	11
5	2	9	803	790	16	2	3	10	91	86	6	4	4	11	0	2	1	6	6	12	432	435	30	3	11	13	84	88	7
6	2	9	0	33	1	3	3	10	670	663	13	5	4	11	729	671	19	1	7	12	808	848	16	1	12	13	160	158	6
7	2	9	0	49	1	4	3	10	162	155	7	6	4	11	98	97	10	2	7	12	71	80	11	0	0	14	1000	954	26
0	3	9	2119	2262	54	5	3	10	162	140	7	0	5	11	404	381	14	3	7	12	0	45	1	2	0	14	1738	1722	31
1	3	9	92	89	8	6	3	10	17	20	16	1	5	11	0	25	1	4	7	12	109	93	6	4	0	14	298	305	8
2	3	9	710	729	13	7	3	10	269	256	13	2	5	11	422	446	11	5	7	12	944	880	18	6	0	14	358	380	12
3	3	9	76	78	7	0	4	10	558	549	16	3	5	11	16	20	15	0	8	12	1063	1136	29	1	1	14	173	175	15
4	3	9	1132	1146	71	1	4	10	98	94	7	4	5	11	438	453	11	1	8	12	84	86	8	2	1	14	218	214	8
5	3	9	141	141	15	2	4	10	585	596	12	5	5	11	64	61	39	2	8	12	386	385	14	3	1	14	416	416	9
6	3	9	234	247	39	3	4	10	118	114	7	6	5	11	82	74	7	3	8	12	0	21	1	4	1	14	103	106	12
7	3	9	36	8	35	4	4	10	802	796	45	1	6	11	198	203	7	4	8	12	340	306	9	5	1	14	203	180	7
1	4	9	607	564	12	5	4	10	0	47	1	2	6	11	117	126	16	5	8	12	133	143	6	6	1	14	112	121	5
2	4	9	59	63	11	6	4	10	0	30	1	3	6	11	380	358	15	1	9	12	391	380	10	0	2	14	1276	1243	33
3	4	9	1301	1309	29	7	4	10	0	3	1	4	6	11	46	40	20	2	9	12	102	114	8	1	2	14	0	14	1
4	4	9	0	28	1	1	5	10	132	37	50	5	6	11	569	563	29	3	9	12	199	205	12	2	2	14	1475	1462	27
5	4	9	939	933	66	2	5	10	12	33	11	6	6	11	125	119	6	4	9	12	67	79	10	3	2	14	53	70	23
6	4	9	101	115	8	3	5	10	328	318	9	0	7	11	1063	1016	28	0	10	12	1394	1453	36	4	2	14	93	84	6
7	4	9	601	622	71	4	5	10	0	15	1	1	7	11	33	13	32	1	10	12	87	85	22	5	2	14	0	12	1
0	5	9	0	48	1	5	5	10	152	98	60	2	7	11	2090	2107	37	2	10	12	150	158	6	6	2	14	41	43	41
1	5	9	56	58	10	6	5	10	54	31	13	3	7	11	85	92	9	3	10	12	27	58	26	1	3	14	134	139	6
2	5	9	290	276	7	0	6	10	663	592	19	4	7	11	124	112	6	4	10	12	857	836	16	2	3	14	145	142	5
3	5	9	0	25	1	1	6	10	72	67	8	5	7	11	61	82	12	1	11	12	115	110	7	3	3	14	511	499	11
4	5	9	215	199	8	2	6	10	465	471	10	6	7	11	469	457	10	2	11	12	0	59	1	4	3	14	116	118	6
5	5	9	0	47	1	3	6	10	125	125	7	1	8	11	524	521	11	3	11	12	0	9	1	5	3	14	407	405	9
6	5	9	30	70	30	4	6	10	325	321	9	2	8	11	98	93	7	0	12	12	805	838	22	6	3	14	49	67	15
7	5	9	23	10	22	5	6	10	47	11	15	3	8	11	600	599	13	1	12	12	53	85	52	0	4	14	144	131	8
1	6	9	406	405	9	6	6	10	272	285	38	4	8	11	44	63	43	2	12	12	150	142	7	1	4	14	22	35	21
2	6	9	59	59	8	1	7	10	437	434	10	5	8	11	251	274	9	1	0	13	393	396	9	2	4	14	490	487	10
3	6	9	678	642	13	2	7	10	0	46	1	0	9	11	132	127	9	3	0	13	418	420	9	3	4	14	29	35	28
4	6	9	0	26	1	3	7	10	664	632	13	1	9	11	69	55	9	5	0	13	852	815	16	4	4	14	308	295	8
5	6	9	109	90	23	4	7	10	0	40	1	2	9	11	257	280	9	0	1	13	229	194	10	5	4	14	14	29	13
6	6	9	65	82	12	5	7	10	237	230	8	3	9	11	56	64	13	1	1	13	252	255	7	1	5	14	524	553	17
0	7	9	2238	2163	57	6	7	10	0	41	1	4	9	11	106	108	7	2	1	13	701	713	13	2	5	14	116	124	6
1	7	9	152	155	6	0	8	10	560	523	17	5	9	11	76	90	28	3	1	13	249	239	8	3	5	14	1445	1379	28
2	7	9	795	809	15	1	8	10	147	140	6	1	10	11	126	126	12	4	1	13	289	280	8	4	5	14	94	100	7
3	7	9	89	68	7	2	8	10	585	580	12	2	10	11	73	60	20	5	1	13	0	11	1	5	5	14	307	278	8
4	7	9	1267	1239	26	3	8	10	100	106	7	3	10	11	1175	1180	22	6	1	13	144	115	6	0	6	14	975	942	26
5	7	9	61	57	18	4	8	10	676	669	14	4	10	11	0	33	1	1	2	13	0	3	1	1	6	14	0	28	1
6	7	9	205	209	8	5	8	10	25	31	24	0	11	11	249	197	14	2	2	13	44	49	16	2	6	14	353	378	11
1	8	9	144	149	6	6	8	10	172	193	20	1	11	11	120	112	7	3	2	13	500	467	11	3	6	14	58	69	13
2	8	9	16	5	15	1	9	10	82	83	7	2	11	11	25	9	24	4	2	13	143	143	6	4	6	14	441	426	10
3	8	9	516	513	20	2	9	10	19	50	19	3	11	11	32	27	31	5	2	13	278	265	8	5	6	14	0	45	1
4	8	9	38	26	20	3	9	10	269	260	9	4	11	11	27	13	26	6	2	13	25	34	24	1	7	14	127	123	6
5	8	9	160	157	6	4	9	10	101	116	7	1	12	11	356	377	9	0	3	13	1043	998	27	2	7	14	21	49	21
6	8	9	0	16	1	5	9	10	0	3	1	2	12	11	29	2	29	1	3	13	104	111	5	3	7	14	445	431	10
0	9	9	240	229	11	0	10	10	279	289	13	3	12	11	512	509	17	2	3	13	695	675	13	4	7	14	41	45	15
1	9	9	160	148	12	1	10	10	0	37	1	0	13	11	379	368	13	3	3	13	111	112	8	5	7	14	444	431	9
2	9	9	103	104	6	2	10	10	26	16	25	1	13	11	76	85	8	4	3	13	315	292	9	0	8	14	464	455	15
3	9	9	141	137	6	3	10	10	34	21	33	0	0	12	2365	2300	60	5	3	13	34	15	34	1	8	14	16	41	16
4	9	9	113	112	8	4	10	10	168	188	7	2	0	12	374	351	8	6	3	13	132	127	5	2	8	14	687	656	14
5	9	9	98	103	6	5	10	10	0	10	1	4	0	12	1819	1754	33	1	4	13	457	454	10	3	8	14	187	171	17
1	10	9	219	232	9	1	11	10	150	155	10	6	0	12	348	304	9	2	4	13	81	69	7	4	8	14	182	178	7
2	10	9	0	31	1	2	11	10	0	2	1	1	1	12	350	334	8	3	4	13	416	412	10	1	9	14	232	241	11
3	10	9	721	657	14	3	11	10	118	111	6	2	1	12															

H-5049-5

Table 12. Observed and calculated structure factors for 1a.

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
5	4	15	79	75	6	5	1	16	0	19	1	1	9	16	230	241	13	3	7	17	0	11	1	1	8	18	108	118	6
0	5	15	1361	1303	35	0	2	16	580	607	17	2	9	16	102	106	8	1	8	17	391	413	9	1	0	19	65	68	7
1	5	15	161	168	6	1	2	16	116	117	5	0	10	16	407	424	13	2	8	17	52	68	10	3	0	19	398	397	9
2	5	15	687	681	13	2	2	16	713	707	14	1	10	16	9	4	9	0	9	17	764	794	20	0	1	19	561	582	16
3	5	15	42	36	28	3	2	16	70	83	15	1	0	17	694	683	13	1	9	17	15	6	14	1	1	19	190	209	8
4	5	15	395	392	9	4	2	16	99	102	5	3	0	17	163	162	6	0	0	18	684	680	19	2	1	19	199	207	7
5	5	15	0	19	1	5	2	16	0	6	1	0	1	17	1181	1228	31	2	0	18	948	945	20	3	1	19	52	50	12
1	6	15	71	93	19	1	3	16	88	87	6	1	1	17	0	16	1	4	0	18	45	40	15	1	2	19	380	396	9
2	6	15	57	68	9	2	3	16	0	14	1	2	1	17	501	497	10	1	1	18	59	52	12	2	2	19	66	66	7
3	6	15	0	20	1	3	3	16	117	126	5	3	1	17	31	53	30	2	1	18	38	27	26	3	2	19	814	824	15
4	6	15	48	52	13	4	3	16	50	33	17	4	1	17	512	513	10	3	1	18	187	210	7	0	3	19	376	369	13
0	7	15	233	231	12	5	3	16	0	12	1	1	2	17	43	23	27	4	1	18	98	90	5	1	3	19	110	122	5
1	7	15	0	47	1	0	4	16	297	281	12	2	2	17	0	18	1	0	2	18	188	181	11	2	3	19	563	565	11
2	7	15	15	2	14	1	4	16	133	129	6	3	2	17	349	311	8	1	2	18	132	132	5	3	3	19	0	23	1
3	7	15	41	18	13	2	4	16	187	205	13	4	2	17	15	29	15	2	2	18	333	324	8	1	4	19	47	44	27
4	7	15	218	224	12	3	4	16	62	62	11	0	3	17	361	316	13	3	2	18	110	115	7	2	4	19	85	90	5
1	8	15	195	205	9	4	4	16	336	343	8	1	3	17	27	39	26	4	2	18	351	354	8	3	4	19	101	89	4
2	8	15	0	23	1	5	4	16	28	6	28	2	3	17	197	202	8	1	3	18	141	160	9	0	5	19	85	77	8
3	8	15	470	453	10	1	5	16	361	358	9	3	3	17	15	16	15	2	3	18	26	13	26	1	5	19	49	40	42
4	8	15	0	23	1	2	5	16	27	40	27	4	3	17	272	270	7	3	3	18	831	841	15	2	5	19	516	522	10
0	9	15	667	670	19	3	5	16	919	922	17	1	4	17	197	178	8	4	3	18	30	34	25	1	6	19	16	38	16
1	9	15	22	54	22	4	5	16	0	17	1	2	4	17	51	56	15	0	4	18	298	297	12	0	0	20	713	722	19
2	9	15	555	520	11	0	6	16	803	844	22	3	4	17	286	292	10	1	4	18	118	120	5	2	0	20	1127	1210	20
3	9	15	73	81	7	1	6	16	124	117	5	4	4	17	59	53	15	2	4	18	548	566	11	1	1	20	259	297	7
1	10	15	28	6	28	2	6	16	325	334	8	0	5	17	1436	1458	37	3	4	18	85	84	7	2	1	20	40	42	12
2	10	15	25	6	24	3	6	16	65	62	7	1	5	17	0	17	1	1	5	18	370	374	9	0	2	20	552	616	16
0	11	15	237	260	10	4	6	16	365	381	8	2	5	17	309	294	10	2	5	18	2	30	2	1	2	20	0	32	1
1	11	15	27	22	26	1	7	16	0	19	1	3	5	17	24	22	23	3	5	18	309	319	8	2	2	20	164	160	7
0	0	16	176	194	11	2	7	16	82	88	17	4	5	17	623	643	12	0	6	18	0	22	1	1	3	20	468	504	10
2	0	16	896	899	17	3	7	16	45	56	12	1	6	17	382	412	9	1	6	18	108	115	5	2	3	20	0	44	1
4	0	16	265	263	8	4	7	16	73	91	6	2	6	17	48	47	9	2	6	18	554	594	11	0	4	20	160	168	10
1	1	16	354	367	9	0	8	16	280	250	12	3	6	17	52	41	22	3	6	18	79	81	7	1	4	20	0	10	1
2	1	16	35	38	34	1	8	16	121	119	5	0	7	17	479	461	15	1	7	18	108	95	5	1	0	21	145	139	6
3	1	16	814	810	15	2	8	16	254	242	8	1	7	17	24	13	24	2	7	18	35	52	33	0	1	21	77	59	6
4	1	16	97	105	6	3	8	16	76	89	6	2	7	17	359	370	8	0	8	18	212	241	10						

H-5099-4

Table 13. Observed and calculated structure factors for 1b.

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1928	1835	49	4	12	0	20	9	19	4	10	1	157	136	8	4	8	2	529	514	14	0	7	3	2223	2171	56
4	0	0	3267	3203	83	5	12	0	125	129	6	5	10	1	167	163	8	5	8	2	94	83	5	1	7	3	223	214	7
6	0	0	1533	1487	39	1	13	0	319	316	10	6	10	1	112	115	5	6	8	2	360	360	11	2	7	3	480	476	13
8	0	0	43	47	43	2	13	0	58	65	7	0	11	1	221	218	8	7	8	2	256	249	9	3	7	3	264	267	8
1	1	0	1308	1384	33	3	13	0	575	556	16	1	11	1	123	130	6	1	9	2	110	117	5	4	7	3	948	931	24
2	1	0	217	230	6	4	13	0	334	353	10	2	11	1	750	742	20	2	9	2	180	177	7	5	7	3	211	198	9
3	1	0	593	637	15	0	14	0	1183	1150	30	3	11	1	135	131	6	3	9	2	65	75	7	6	7	3	347	326	11
4	1	0	672	667	17	1	14	0	29	12	11	4	11	1	140	138	6	4	9	2	22	6	21	7	7	3	163	174	8
5	1	0	482	465	13	2	14	0	0	26	1	5	11	1	21	22	20	5	9	2	171	177	9	1	8	3	867	863	22
6	1	0	203	196	8	3	14	0	37	45	8	1	12	1	95	98	5	6	9	2	7	36	7	2	8	3	117	112	5
7	1	0	567	567	15	1	15	0	592	620	16	2	12	1	112	118	5	0	10	2	1232	1205	31	3	8	3	801	795	21
8	1	0	28	41	16	2	15	0	68	65	5	3	12	1	587	575	16	1	10	2	181	181	7	4	8	3	411	409	12
0	2	0	1941	1989	49	1	0	1	1786	1924	45	4	12	1	175	158	8	2	10	2	1330	1304	34	5	8	3	1276	1254	33
1	2	0	255	263	6	3	0	1	605	710	16	5	12	1	352	360	10	3	10	2	82	73	6	6	8	3	25	13	25
2	2	0	332	310	9	5	0	1	544	590	16	0	13	1	43	21	9	4	10	2	384	373	12	7	8	3	436	434	12
3	2	0	123	126	5	7	0	1	647	766	19	1	13	1	85	84	5	5	10	2	89	84	5	0	9	3	761	740	20
4	2	0	270	260	8	0	1	1	313	304	8	2	13	1	312	310	10	6	10	2	30	10	29	1	9	3	342	328	10
5	2	0	268	261	9	1	1	1	51	58	2	3	13	1	113	119	5	1	11	2	220	219	8	2	9	3	715	700	19
6	2	0	485	482	14	2	1	1	1399	1390	35	4	13	1	44	60	10	2	11	2	82	83	6	3	9	3	218	213	8
7	2	0	116	108	5	3	1	1	265	268	7	1	14	1	165	156	6	3	11	2	142	131	6	4	9	3	278	270	10
8	2	0	182	183	8	4	1	1	159	161	6	2	14	1	42	36	7	4	11	2	85	83	5	5	9	3	344	340	11
1	3	0	1457	1460	37	5	1	1	0	17	1	3	14	1	394	398	11	5	11	2	383	390	11	6	9	3	147	153	8
2	3	0	126	136	5	6	1	1	496	482	14	0	15	1	130	145	6	0	12	2	689	682	18	1	10	3	73	60	5
3	3	0	122	163	5	7	1	1	306	305	10	1	15	1	115	106	6	1	12	2	87	79	6	2	10	3	219	210	8
4	3	0	701	713	18	8	1	1	197	201	8	2	15	1	668	673	17	2	12	2	79	58	5	3	10	3	823	805	21
5	3	0	1707	1694	43	1	2	1	271	265	7	0	0	2	3863	3785	98	3	12	2	45	39	7	4	10	3	356	351	11
6	3	0	209	217	8	2	2	1	133	137	4	2	0	2	3098	3010	79	4	12	2	473	470	13	5	10	3	439	421	13
7	3	0	788	758	21	3	2	1	35	61	4	4	0	2	1125	1069	29	5	12	2	0	35	1	6	10	3	93	90	5
8	3	0	105	101	5	4	2	1	44	37	4	6	0	2	34	38	33	1	13	2	67	62	5	0	11	3	182	195	8
0	4	0	4081	3955	104	5	2	1	216	214	8	8	0	2	380	373	12	2	13	2	211	196	9	1	11	3	158	160	8
1	4	0	270	278	7	6	2	1	43	25	9	1	1	2	317	356	8	3	13	2	649	624	17	2	11	3	1123	1118	29
2	4	0	689	697	17	7	2	1	434	416	13	2	1	2	387	394	10	4	13	2	59	67	8	3	11	3	63	63	6
3	4	0	142	143	6	8	2	1	140	139	6	3	1	2	332	302	9	0	14	2	607	621	16	4	11	3	120	121	5
4	4	0	755	772	19	0	3	1	296	312	7	4	1	2	148	143	7	1	14	2	0	2	1	5	11	3	259	268	9
5	4	0	662	643	17	1	3	1	57	62	3	5	1	2	364	366	11	2	14	2	447	439	13	1	12	3	832	829	22
6	4	0	1258	1248	32	2	3	1	875	890	22	6	1	2	318	311	11	3	14	2	130	125	7	2	12	3	86	86	6
7	4	0	18	11	18	3	3	1	224	233	7	7	1	2	220	224	9	1	15	2	167	166	8	3	12	3	489	466	14
8	4	0	310	311	9	4	3	1	77	75	4	8	1	2	88	80	6	2	15	2	36	61	36	4	12	3	162	167	8
1	5	0	1407	1459	35	5	3	1	167	174	8	0	2	2	1121	1200	28	1	0	3	29	49	8	5	12	3	1092	1132	28
2	5	0	150	150	5	6	3	1	102	94	6	1	2	2	63	70	3	3	0	3	59	34	6	0	13	3	551	533	15
3	5	0	204	212	7	7	3	1	254	238	9	2	2	2	537	569	14	5	0	3	417	389	12	1	13	3	0	40	1
4	5	0	292	289	9	8	3	1	173	174	8	3	2	2	101	102	4	7	0	3	716	691	19	2	13	3	107	102	5
5	5	0	1359	1333	34	1	4	1	481	509	12	4	2	2	345	347	10	0	1	3	984	1002	25	3	13	3	25	24	25
6	5	0	127	120	6	2	4	1	317	318	8	5	2	2	33	39	11	1	1	3	53	53	3	4	13	3	263	265	9
7	5	0	268	259	9	3	4	1	406	378	11	6	2	2	412	419	12	2	1	3	1644	1658	41	1	14	3	54	58	7
0	6	0	390	273	10	4	4	1	186	184	7	7	2	2	190	184	9	3	1	3	39	17	5	2	14	3	80	81	6
1	6	0	575	566	15	5	4	1	342	328	10	8	2	2	155	162	8	4	1	3	539	506	14	3	14	3	293	297	9
2	6	0	563	524	14	6	4	1	179	165	9	1	3	2	77	71	3	5	1	3	674	647	18	0	15	3	568	567	15
3	6	0	29	15	7	7	4	1	208	217	9	2	3	2	360	368	9	6	1	3	621	595	17	1	15	3	191	191	8
4	6	0	267	283	8	8	4	1	320	323	10	3	3	2	887	912	22	7	1	3	309	310	12	2	15	3	731	723	19
5	6	0	584	575	16	0	5	1	215	216	6	4	3	2	139	133	7	8	1	3	155	168	7	0	0	4	1441	1478	36
6	6	0	361	365	11	1	5	1	7	2	7	5	3	2	742	721	19	1	2	3	1630	1626	41	2	0	4	948	971	24
7	6	0	19	33	19	2	5	1	743	795	19	6	3	2	283	274	10	2	2	3	57	65	3	4	0	4	511	522	14
1	7	0	1454	1440	37	3	5	1	0	8	1	7	3	2	887	851	23	3	2	3	32	29	6	6	0	4	766	769	20
2	7	0	362	360	10	4	5	1	381	366	11	8	3	2	52	54	7	4	2	3	264	264	8	8	0	4	399	408	12
3	7	0	163	166	7	5	5	1	0	4	1	0	4	2	1833	1857	46	5	2	3	1552	1538	39	1	1	4	1317	1280	33
4	7	0	157	165	8	6	5	1	292	273	10	1	4	2	191	197	6	6	2	3	123	120	6	2	1	4	159	157	6
5	7	0	1761	1753	45	7	5	1	27	29	27	2	4	2	707	752	18	7	2	3	4								

H-5049-7

Table 13. Observed and calculated structure factors for 1b.

Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	5	4	43	17	5	7	3	5	111	104	6	1	3	6	666	688	17	3	2	7	1337	1540	34	3	2	8	56	55	5
4	5	4	174	174	7	1	4	5	67	51	3	2	3	6	308	292	9	4	2	7	106	117	6	4	2	8	665	627	18
5	5	4	1298	1284	33	2	4	5	49	47	4	3	3	6	1117	1109	28	5	2	7	257	275	10	5	2	8	184	169	9
6	5	4	108	111	5	3	4	5	190	188	7	4	3	6	269	262	9	6	2	7	204	181	10	6	2	8	253	221	10
7	5	4	152	141	6	4	4	5	160	149	7	5	3	6	312	323	10	7	2	7	760	731	20	7	2	8	131	129	7
0	6	4	1230	1183	31	5	4	5	0	22	1	6	3	6	130	110	7	0	3	7	1252	1302	32	1	3	8	47	41	5
1	6	4	287	295	8	6	4	5	84	81	6	7	3	6	704	752	19	1	3	7	471	444	12	2	3	8	263	264	9
2	6	4	457	474	12	7	4	5	225	230	9	0	4	6	576	555	15	2	3	7	417	398	11	3	3	8	113	108	6
3	6	4	169	168	7	0	5	5	485	578	13	1	4	6	42	35	4	3	3	7	125	119	6	4	3	8	107	124	6
4	6	4	43	25	8	1	5	5	173	177	6	2	4	6	1146	1094	29	4	3	7	1227	1169	31	5	3	8	348	347	12
5	6	4	107	102	5	2	5	5	303	324	9	3	4	6	181	184	7	5	3	7	157	151	7	6	3	8	91	94	7
6	6	4	261	285	9	3	5	5	105	104	5	4	4	6	120	111	6	6	3	7	364	405	12	7	3	8	102	110	7
7	6	4	54	52	6	4	5	5	549	553	15	5	4	6	254	242	9	7	3	7	19	5	19	0	4	8	968	911	25
1	7	4	87	84	4	5	5	5	133	131	7	6	4	6	229	219	9	1	4	7	196	199	6	1	4	8	340	339	10
2	7	4	66	59	4	6	5	5	417	405	12	7	4	6	385	390	11	2	4	7	79	76	4	2	4	8	587	528	15
3	7	4	195	205	8	7	5	5	153	154	8	1	5	6	1011	954	26	3	4	7	549	531	15	3	4	8	58	54	6
4	7	4	163	164	8	1	6	5	686	636	17	2	5	6	291	291	8	4	4	7	102	95	5	4	4	8	285	282	10
5	7	4	71	22	7	2	6	5	139	144	6	3	5	6	974	980	25	5	4	7	513	523	14	5	4	8	258	236	10
6	7	4	23	34	22	3	6	5	673	676	17	4	5	6	101	104	5	6	4	7	311	294	11	6	4	8	23	71	23
7	7	4	194	191	8	4	6	5	247	233	8	5	5	6	1336	1313	34	7	4	7	316	365	11	7	4	8	353	324	12
0	8	4	845	859	22	5	6	5	542	536	15	6	5	6	89	86	6	0	5	7	185	161	6	1	5	8	855	814	22
1	8	4	271	261	8	6	6	5	14	8	14	7	5	6	865	870	22	1	5	7	251	242	8	2	5	8	52	53	5
2	8	4	612	608	16	7	6	5	112	97	6	0	6	6	61	50	4	2	5	7	462	476	12	3	5	8	617	597	16
3	8	4	204	203	8	0	7	5	1488	1447	38	1	6	6	115	112	6	3	5	7	67	56	5	4	5	8	31	33	17
4	8	4	651	654	17	1	7	5	77	81	4	2	6	6	222	226	8	4	5	7	196	192	8	5	5	8	1294	1245	33
5	8	4	60	66	9	2	7	5	78	77	4	3	6	6	229	235	8	5	5	7	25	45	24	6	5	8	45	44	12
6	8	4	153	154	8	3	7	5	0	1	1	4	6	6	222	227	9	6	5	7	226	238	9	7	5	8	303	342	10
7	8	4	22	7	21	4	7	5	748	742	20	5	6	6	359	350	11	7	5	7	51	60	8	0	6	8	335	326	10
1	9	4	710	706	18	5	7	5	231	231	9	6	6	6	219	210	9	1	6	7	81	72	4	1	6	8	218	219	8
2	9	4	37	42	9	6	7	5	467	452	13	7	6	6	393	393	11	2	6	7	150	155	7	2	6	8	0	17	1
3	9	4	174	185	8	7	7	5	14	40	13	1	7	6	499	498	13	3	6	7	885	869	23	3	6	8	82	84	5
4	9	4	52	44	7	1	8	5	610	625	16	2	7	6	249	244	8	4	6	7	170	157	8	4	6	8	279	284	10
5	9	4	908	906	23	2	8	5	70	69	5	3	7	6	1115	1104	28	5	6	7	396	398	12	5	6	8	258	251	10
6	9	4	0	12	1	3	8	5	133	126	6	4	7	6	0	20	1	6	6	7	275	258	10	6	6	8	308	325	10
0	10	4	296	299	9	4	8	5	3	22	3	5	7	6	188	179	9	7	6	7	416	448	12	7	6	8	247	326	9
1	10	4	0	10	1	5	8	5	1028	1013	26	6	7	6	54	53	8	0	7	7	1238	1227	31	1	7	8	98	98	5
2	10	4	639	634	17	6	8	5	159	165	6	7	7	6	647	691	17	1	7	7	448	443	12	2	7	8	0	5	1
3	10	4	68	70	7	0	9	5	924	897	24	0	8	6	1021	995	26	2	7	7	425	400	12	3	7	8	239	246	9
4	10	4	633	633	17	1	9	5	33	26	10	1	8	6	111	106	5	3	7	7	117	125	6	4	7	8	34	17	15
5	10	4	90	93	5	2	9	5	474	463	13	2	8	6	1925	1898	49	4	7	7	1133	1105	29	5	7	8	455	423	13
6	10	4	97	91	5	3	9	5	50	60	8	3	8	6	22	24	21	5	7	7	25	34	24	6	7	8	0	4	1
1	11	4	576	575	16	4	9	5	613	607	17	4	8	6	56	61	8	6	7	7	423	411	12	0	8	8	1582	1545	40
2	11	4	64	76	7	5	9	5	90	89	6	5	8	6	322	308	10	1	8	7	526	518	14	1	8	8	472	466	13
3	11	4	88	93	5	6	9	5	63	57	7	6	8	6	446	445	13	2	8	7	21	13	20	2	8	8	670	644	18
4	11	4	49	48	7	1	10	5	505	496	14	1	9	6	636	631	17	3	8	7	949	908	24	3	8	8	140	132	6
5	11	4	606	606	16	2	10	5	33	42	33	2	9	6	223	222	9	4	8	7	39	27	11	4	8	8	654	631	18
0	12	4	501	467	14	3	10	5	536	558	15	3	9	6	391	373	12	5	8	7	191	198	8	5	8	8	212	201	9
1	12	4	27	5	27	4	10	5	95	82	5	4	9	6	178	181	9	6	8	7	133	147	7	6	8	8	308	321	10
2	12	4	518	496	14	5	10	5	514	503	14	5	9	6	834	835	22	0	9	7	463	480	13	1	9	8	228	209	9
3	12	4	121	110	6	6	10	5	80	76	5	6	9	6	0	37	1	1	9	7	473	462	13	2	9	8	189	178	8
4	12	4	331	338	10	0	11	5	937	953	24	0	10	6	824	826	21	2	9	7	402	386	12	3	9	8	478	475	14
5	12	4	157	153	8	1	11	5	329	313	10	1	10	6	353	342	11	3	9	7	272	274	10	4	9	8	274	270	10
1	13	4	184	168	8	2	11	5	304	292	10	2	10	6	1363	1332	35	4	9	7	224	201	9	5	9	8	549	534	15
2	13	4	0	4	1	3	11	5	125	129	6	3	10	6	234	237	9	5	9	7	178	177	8	6	9	8	59	63	5
3	13	4	0	9	1	4	11	5	566	564	15	4	10	6	144	155	6	6	9	7	0	37	1	0	10	8	1290	1243	33
4	13	4	46	56	7	5	11	5	154	154	8	5	10	6	0	4	1	1	10	7	445	431	13	1	10	8	331	340	11
0	14	4	147	148	8	1	12	5	395	379	12	6	10	6	298	321	9	2	10	7	29	5	28	2	10	8	991	972	26
1	14	4	0	27	1	2	12	5	117	122	5	1	11	6	34	58	34	3	10	7	233	244	9	3	10	8	134	130	6
2	14	4	414	414																									

H-5049-8

Table 13. Observed and calculated structure factors for 1b.

Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	2	9	154	152	7	7	2	10	18	15	17	2	4	11	311	307	10	4	6	12	167	152	7	1	11	13	278	274	10
4	2	9	66	65	6	1	3	10	282	284	9	3	4	11	764	740	20	5	6	12	489	475	14	2	11	13	625	599	17
5	2	9	692	679	18	2	3	10	232	215	8	4	4	11	0	0	7	6	6	12	311	314	10	3	11	13	242	261	9
6	2	9	91	80	6	3	3	10	650	649	17	5	4	11	747	714	20	1	7	12	693	746	19	1	12	13	140	147	6
7	2	9	34	60	33	4	3	10	447	436	13	6	4	11	254	244	10	2	7	12	221	215	11	0	0	14	907	897	23
0	3	9	1630	1978	41	5	3	10	134	119	7	0	5	11	355	383	11	3	7	12	139	128	7	2	0	14	1380	1386	35
1	3	9	199	213	8	6	3	10	0	11	1	1	5	11	57	60	8	4	7	12	236	220	10	4	0	14	166	182	8
2	3	9	683	748	18	7	3	10	263	247	9	2	5	11	376	389	12	5	7	12	747	723	20	6	0	14	234	245	8
3	3	9	197	188	8	0	4	10	411	459	12	3	5	11	50	51	9	0	8	12	928	1076	25	1	1	14	172	176	8
4	3	9	1085	1068	28	1	4	10	234	264	9	4	5	11	546	525	16	1	8	12	202	241	10	2	1	14	543	543	15
5	3	9	353	338	12	2	4	10	461	499	13	5	5	11	145	146	7	2	8	12	346	378	12	3	1	14	461	451	13
6	3	9	126	130	6	3	4	10	323	329	11	6	5	11	0	24	1	3	8	12	69	58	8	4	1	14	269	281	9
7	3	9	50	44	8	4	4	10	794	758	21	1	6	11	239	249	10	4	8	12	440	419	13	5	1	14	119	120	6
1	4	9	450	410	12	5	4	10	137	125	7	2	6	11	295	346	11	5	8	12	322	321	10	6	1	14	293	310	9
2	4	9	169	156	8	6	4	10	28	24	28	3	6	11	263	264	10	1	9	12	309	357	12	0	2	14	879	876	23
3	4	9	1303	1340	33	7	4	10	22	2	21	4	6	11	101	105	8	2	9	12	279	305	11	1	2	14	64	63	5
4	4	9	44	56	13	1	5	10	65	61	6	5	6	11	504	451	15	3	9	12	262	258	10	2	2	14	1295	1265	33
5	4	9	793	834	21	2	5	10	89	91	6	6	6	11	315	293	10	4	9	12	190	196	9	3	2	14	162	162	8
6	4	9	324	293	12	3	5	10	314	339	11	0	7	11	950	915	25	0	10	12	1143	1296	30	4	2	14	41	17	7
7	4	9	663	614	18	4	5	10	31	35	31	1	7	11	57	48	9	1	10	12	203	214	11	5	2	14	0	24	1
0	5	9	0	10	1	5	5	10	0	24	1	2	7	11	1998	2027	51	2	10	12	183	175	10	6	2	14	112	108	5
1	5	9	142	141	7	6	5	10	33	44	32	3	7	11	196	211	11	3	10	12	181	174	9	1	3	14	98	89	5
2	5	9	273	264	9	0	6	10	567	530	15	4	7	11	0	38	1	4	10	12	857	825	22	2	3	14	364	367	11
3	5	9	70	72	6	1	6	10	228	214	9	5	7	11	190	186	9	1	11	12	142	145	7	3	3	14	382	368	11
4	5	9	191	194	10	2	6	10	396	360	12	6	7	11	316	309	10	2	11	12	157	159	7	4	3	14	297	304	10
5	5	9	81	90	8	3	6	10	342	331	11	1	8	11	568	545	16	3	11	12	35	7	34	5	3	14	329	311	10
6	5	9	0	6	1	4	6	10	334	346	12	2	8	11	262	252	10	0	12	12	691	746	19	6	3	14	166	176	7
7	5	9	48	39	9	5	6	10	26	12	25	3	8	11	477	514	14	1	12	12	216	213	9	0	4	14	218	225	9
1	6	9	477	466	13	6	6	10	242	221	10	4	8	11	138	139	6	2	12	12	74	77	6	1	4	14	132	122	6
2	6	9	148	154	8	1	7	10	399	387	12	5	8	11	375	365	12	1	0	13	658	663	17	2	4	14	435	439	13
3	6	9	682	632	18	2	7	10	119	111	6	0	9	11	55	32	8	3	0	13	285	279	10	3	4	14	82	77	6
4	6	9	63	59	7	3	7	10	588	567	16	1	9	11	173	152	7	5	0	13	885	850	23	4	4	14	331	337	10
5	6	9	120	111	6	4	7	10	131	124	6	2	9	11	232	234	10	0	1	13	163	139	7	5	4	14	69	63	6
6	6	9	162	206	7	5	7	10	170	209	8	3	9	11	156	173	8	1	1	13	672	675	18	1	5	14	600	589	16
0	7	9	2184	2120	55	6	7	10	85	89	7	4	9	11	140	156	7	2	1	13	687	681	18	2	5	14	299	303	10
1	7	9	404	394	12	0	8	10	484	461	14	5	9	11	220	213	9	3	1	13	618	619	17	3	5	14	1273	1219	33
2	7	9	733	729	19	1	8	10	392	383	12	1	10	11	183	182	9	4	1	13	179	170	8	4	5	14	243	246	9
3	7	9	194	186	8	2	8	10	702	678	19	2	10	11	164	166	8	5	1	13	28	40	28	5	5	14	215	204	8
4	7	9	1180	1168	30	3	8	10	278	275	10	3	10	11	1065	1134	28	6	1	13	173	149	8	0	6	14	926	919	24
5	7	9	156	148	7	4	8	10	564	560	16	4	10	11	105	104	6	1	2	13	36	17	7	1	6	14	119	114	6
6	7	9	104	128	6	5	8	10	44	73	16	0	11	11	339	322	11	2	2	13	110	110	5	2	6	14	215	224	9
1	8	9	122	102	6	6	8	10	341	303	11	1	11	11	325	312	11	3	2	13	304	286	10	3	6	14	156	151	8
2	8	9	0	5	1	1	9	10	2	34	2	2	11	11	143	90	7	4	2	13	373	372	11	4	6	14	372	374	11
3	8	9	486	480	14	2	9	10	140	136	7	3	11	11	47	60	10	5	2	13	238	240	9	5	6	14	116	102	6
4	8	9	53	62	9	3	9	10	289	262	10	4	11	11	29	20	15	6	2	13	75	85	5	1	7	14	93	84	6
5	8	9	72	71	7	4	9	10	298	295	11	1	12	11	324	350	11	0	3	13	890	871	23	2	7	14	104	103	5
6	8	9	16	36	16	5	9	10	0	33	1	2	12	11	29	3	29	1	3	13	303	297	10	3	7	14	360	351	11
0	9	9	48	49	7	0	10	10	203	217	9	3	12	11	468	486	13	2	3	13	539	540	15	4	7	14	112	114	5
1	9	9	390	379	12	1	10	10	94	82	6	0	13	11	203	253	10	3	3	13	233	241	9	5	7	14	329	338	10
2	9	9	120	108	5	2	10	10	0	20	1	1	13	11	201	230	9	4	3	13	208	196	8	0	8	14	440	430	13
3	9	9	376	365	12	3	10	10	54	51	9	0	0	12	1989	1984	50	5	3	13	54	43	8	1	8	14	136	141	6
4	9	9	38	22	11	4	10	10	30	65	30	2	0	12	350	311	10	6	3	13	181	173	8	2	8	14	626	594	17
5	9	9	291	297	10	5	10	10	14	4	14	4	0	12	1597	1567	41	1	4	13	484	480	13	3	8	14	79	85	6
1	10	9	297	292	10	1	11	10	190	173	9	6	0	12	292	275	10	2	4	13	178	183	9	4	8	14	175	174	7
2	10	9	64	68	7	2	11	10	37	21	10	1	1	12	267	265	9	3	4	13	223	218	9	1	9	14	228	234	9
3	10	9	641	589	17	3	11	10	70	59	6	2	1	12	85	78	5	4	4	13	468	454	13	2	9	14	0	31	1
4	10	9	120	124	6	4	11	10	210	238	9	3	1	12	246	250	9	5	4	13	615	610	17	3	9	14	511	493	14

H-5049-9

Table 13. Observed and calculated structure factors for 1b.

Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	5	15	387	404	12	0	2	16	565	593	15	2	9	16	251	263	8	2	7	17	256	274	9	2	7	18	97	112	5
2	5	15	667	671	18	1	2	16	332	334	11	0	10	16	394	404	11	3	7	17	23	6	22	0	8	18	194	196	7
3	5	15	85	80	5	2	2	16	539	538	15	1	10	16	21	22	20	1	8	17	304	314	10	1	0	19	24	18	24
4	5	15	407	398	12	3	2	16	231	223	9	1	0	17	566	544	15	2	8	17	142	155	7	3	0	19	341	337	10
5	5	15	63	61	5	4	2	16	43	30	7	3	0	17	188	175	8	0	9	17	696	715	18	0	1	19	487	512	14
1	6	15	59	53	7	5	2	16	0	40	1	0	1	17	1044	1045	27	1	9	17	35	13	7	1	1	19	530	553	14
2	6	15	167	172	9	1	3	16	81	84	5	1	1	17	0	8	1	0	0	18	428	357	12	2	1	19	137	141	6
3	6	15	60	63	6	2	3	16	24	47	24	2	1	17	329	337	10	2	0	18	940	910	24	3	1	19	172	165	7
4	6	15	148	148	7	3	3	16	61	61	6	3	1	17	134	125	6	4	0	18	23	2	23	1	2	19	423	434	12
0	7	15	245	249	9	4	3	16	117	122	6	4	1	17	504	501	14	1	1	18	85	92	6	2	2	19	163	168	8
1	7	15	91	94	5	5	3	16	73	73	4	1	2	17	148	121	8	2	1	18	95	89	5	3	2	19	720	734	19
2	7	15	25	39	25	0	4	16	324	317	10	2	2	17	4	44	4	3	1	18	214	227	8	0	3	19	436	457	12
3	7	15	80	70	6	1	4	16	383	365	12	3	2	17	312	283	10	4	1	18	259	266	9	1	3	19	295	314	9
4	7	15	159	169	7	2	4	16	174	149	8	4	2	17	81	80	5	0	2	18	218	227	9	2	3	19	452	453	13
1	8	15	236	227	9	3	4	16	191	185	8	0	3	17	261	235	9	1	2	18	344	335	11	3	3	19	63	71	5
2	8	15	66	58	5	4	4	16	354	358	11	1	3	17	123	109	6	2	2	18	259	265	9	1	4	19	23	4	23
3	8	15	433	413	12	1	5	16	297	302	10	2	3	17	147	147	6	3	2	18	309	311	10	2	4	19	248	244	8
4	8	15	49	51	6	2	5	16	91	88	5	3	3	17	39	36	8	4	2	18	269	285	9	0	5	19	18	19	18
0	9	15	620	617	17	3	5	16	903	898	23	4	3	17	211	217	8	1	3	18	190	185	9	1	5	19	99	104	5
1	9	15	159	163	8	4	5	16	29	39	15	1	4	17	235	223	9	2	3	18	67	69	6	2	5	19	438	439	12
2	9	15	463	457	13	0	6	16	683	700	18	2	4	17	131	133	6	3	3	18	754	752	20	1	6	19	0	13	1
3	9	15	212	210	8	1	6	16	358	351	11	3	4	17	249	262	9	4	3	18	124	111	6	0	0	20	595	615	16
1	10	15	0	19	1	2	6	16	326	341	10	4	4	17	152	144	8	0	4	18	172	178	8	2	0	20	946	965	24
2	10	15	0	16	1	3	6	16	185	181	8	0	5	17	1317	1299	34	1	4	18	318	311	10	1	1	20	249	250	8
0	11	15	222	232	8	4	6	16	338	367	10	1	5	17	13	24	12	2	4	18	463	456	13	2	1	20	94	103	5
0	0	16	250	215	9	1	7	16	40	44	10	2	5	17	181	179	8	3	4	18	215	222	8	0	2	20	406	416	11
2	0	16	782	779	20	2	7	16	219	219	8	3	5	17	41	59	10	1	5	18	406	411	12	1	2	20	60	64	5
4	0	16	462	443	13	3	7	16	124	124	6	4	5	17	563	590	15	2	5	18	28	47	27	2	2	20	222	224	8
1	1	16	359	342	11	0	8	16	198	177	8	1	6	17	360	382	11	3	5	18	264	271	9	1	3	20	427	448	12
2	1	16	134	124	6	1	8	16	347	340	11	2	6	17	118	112	6	0	6	18	108	104	6	2	3	20	89	100	5
3	1	16	712	698	19	2	8	16	191	178	8	3	6	17	149	153	8	1	6	18	301	300	10	0	4	20	125	129	5
4	1	16	287	279	9	3	8	16	208	222	8	0	7	17	379	365	11	2	6	18	542	559	15	1	4	20	22	38	15
5	1	16	20	16	19	1	9	16	179	186	8	1	7	17	0	31	1	1	7	18	159	150	7						